

Интеграция теоретических и экспериментальных подходов к изучению механизмов каталитических реакций как основа рационального дизайна катализаторов

Евгений А. Пидько

Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург, Россия
Эйндховенский Технологический Университет, г. Эйндховен, Нидерланды



Евгений Пидько окончил Высший Химический Колледж РАН в 2004 году, в 2008 г. защитил кандидатскую диссертацию, PhD, по неорганической химии и катализу в Эйндховенском Технологическом Университете, г. Эйндховен, Нидерланды, где по сей день занимает должность доцента (assistant professor) и возглавляет группу молекулярной неорганической химии. С 2016 года, он также является главным научным сотрудником, профессором теоретической химии в Университете ИТМО, г. Санкт-Петербург. Область научных интересов - катализ в разработке новых энерго- и ресурсоэффективных химических технологий. В своих исследованиях он успешно сочетает теоретические и экспериментальные подходы к исследованию широкого круга каталитических объектов, включающего в себя комплексы переходных металлов, цеолиты, метал-органические каркасы и другие. Е. Пидько является автором более 110 публикаций в международных рецензируемых журналах, 9 обзорных глав и одного международного патента.

Переход к замкнутым энергетическим и сырьевым циклам в условия концепции устойчивого развития представляется важнейшей задачей для человечества в 21 веке. Предполагается, что уже в ближайшем будущем значительно возрастет роль таких альтернативных субстратов как природный газ, биомасса и CO_2 для обеспечения нужд химической промышленности. Катализ выступает в роли краеугольного камня во всех химических сценариях развития более эффективных и устойчивых технологических процессов. Для их реализации необходимы наиболее активные, селективные и долгоживущие катализаторы, которые бы позволили эффективно получать важные химические продукты из альтернативного сырья. Исторически, все важные открытия в катализе, как, впрочем, и в химии, были получены в результате интуитивного поиска методом проб и ошибок. Сегодня главной задачей катализа как научной дисциплины является разработка новых фундаментальных подходов, которые бы позволили осуществить рациональный дизайн каталитического процесса для заданного химического превращения. Прогресс в этом направлении предполагает детальное понимание того, как катализатор ускоряет химическое превращение на молекулярном уровне, и как осуществить контроль за его свойствами и реакционной способностью.

Мне представляется, что решение этой задачи возможно лишь в рамках междисциплинарного подхода, интегрирующего экспериментальные и теоретические методы, стирая условные границы между классическими областями химии, физики и инженерии. В докладе будут проиллюстрированы возможности и перспективы данного подхода на примере последних работ моей группы по двум основным направлениям: металлокомплексный катализ для гидрирования карбонилсодержащих соединений [1-3] и селективная оксо-функционализация метана.[4-6] На данных примерах будут показаны возможности современной расчетной химии в сочетании с экспериментом для создания детального механистического описания каталитических процессов, а также продемонстрировано, как подобное фундаментальное знание может быть использовано в разработке новых и улучшенных каталитических систем как части целостных технологических решений.

- [1] R. van Putten, E.A. Uslamin, M. Garbe, C. Liu, A. Gonzalez-de-Castro, M. Lutz, K. Junge, E.J.M. Hensen, M. Beller, L. Lefort, E.A. Pidko, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**,
- [2] G.A. Filonenko, M. Joanne B. Aguil, E.N. Schulpen, R. van Putten, J. Wiecko, C. Müller, L. Lefort, E.J.M. Hensen, E.A. Pidko, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 7620
- [3] G.A. Filonenko, D. Smykowski, B.M. Szyja, E.J.M. Hensen, E.A. Pidko, *ACS Catal.* **2015**, *5*, 1145
- [4] A. I. Olivos-Suarez, À. Szécsényi, E. J. M. Hensen, J. Ruiz-Martinez, E.A. Pidko, J. Gascon, *ACS Catal.* **2016**, *6*, 2965
- [5] G. Li, P. Vassilev, M. Sanchez-Sanchez, J. Lercher, E.J.M. Hensen, E.A. Pidko, *J. Catal.* **2016**, *338*, 305
- [6] S. Grundner, M. Markovits, G. Li, M. Tromp, E.A. Pidko, E.J.M. Hensen, A. Jentys, M. Sanchez-Sanchez, J.A. Lercher, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 7546